

УДК 544.4+004.4

ПОИСК ОПТИМАЛЬНЫХ НАЧАЛЬНЫХ КОНЦЕНТРАЦИЙ ВЕЩЕСТВ КАТАЛИТИЧЕСКОЙ РЕАКЦИИ НА ОСНОВЕ КИНЕТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ

© Е. В. Антипина¹, С. А. Мустафина¹, А. Ф. Антипин²

¹Уфимский университет науки и технологий,
450076, г. Уфа, ул. Заки Валиди, 32

²Стерлитамакский филиал Уфимского университета науки и технологий,
453103, г. Стерлитамак, просп. Ленина, 49
E-mail: stepashinaev@ya.ru

Сформулирован численный алгоритм поиска оптимальных начальных концентраций веществ каталитической реакции, сочетающий принципы кинетического моделирования и эволюционных вычислений. Сформулирована задача оптимального управления каталитической реакцией, где управляющим параметром является вектор начальных концентраций исходных веществ. Описан пошаговый алгоритм решения поставленной задачи, в основу которого положен метод дифференциальной эволюции. Проведён вычислительный эксперимент для реакции аминометилирования тиолов с помощью тетраметилметандиамина. С использованием описанного алгоритма вычислены оптимальные концентрации исходных веществ, при которых достигается наибольшее значение концентрации продукта реакции. Показано, что вычисленные значения начальных концентраций веществ согласуются с результатами химического эксперимента.

Ключевые слова: кинетическая модель реакции, оптимальные начальные концентрации, дифференциальная эволюция.

DOI: 10.15372/AUT20230409

Введение. Важнейшей задачей исследования каталитической реакции является определение оптимальных условий её протекания, которое требует проведения многократных экспериментов. Однако ввиду сложного состава исходного сырья, невысокого содержания в нём ценных компонентов, дорогостоящих реагентов и оборудования целесообразно воспользоваться методами математического моделирования. Математические методы позволяют без проведения натурального эксперимента выявить закономерности протекания каталитической реакции и определить оптимальные условия её проведения.

Практически значимой задачей исследования реакции является прогнозирование выхода или свойств получаемого продукта в зависимости от соотношения начальных концентраций веществ. Определить значения концентраций веществ в каждый момент времени при произвольном наборе начальных концентраций можно на основе кинетической модели реакции, которая является системой нелинейных дифференциальных уравнений. Поиск оптимальных начальных концентраций представляет собой задачу оптимального управления, в которой фазовыми переменными являются концентрации веществ, а управляющим параметром — вектор начальных концентраций.

Каталитические реакции, как правило, протекают с участием большого количества веществ. Это усложняет математическое описание процесса, так как количество уравнений кинетической модели реакции определяется числом взаимодействующих веществ. Высокая размерность оптимизационной задачи, нелинейность кинетической модели создают трудности при применении классических методов решения задач оптимального управления ввиду больших вычислительных затрат при реализации их численного решения [1–3].

Кроме того, одной из особенностей большинства численных методов решения оптимизационных задач является чувствительность найденного решения к начальному приближению, что, в свою очередь, требует от исследователя знания некоторого приближения этой начальной точки хотя бы из физико-химических соображений поставленной задачи.

Для преодоления указанных трудностей при определении оптимальных начальных концентраций веществ реакции можно воспользоваться методом дифференциальной эволюции, который представляет собой метод поисковой оптимизации, основанный на эволюционном моделировании механизмов живой природы с помощью принципов популяционной генетики [4–7]. Данный метод оперирует с целой совокупностью возможных решений, образующих популяцию, и не зависит от начального приближения решения задачи. Преимуществами метода является отсутствие требований непрерывности и дифференцируемости критерия оптимальности [8–10], поскольку метод использует в своей работе только целевую функцию, а не её производные, что положительно влияет на его сходимость и позволяет сократить число шагов поиска решения.

Меньшая ресурсозатратность метода дифференциальной эволюции по сравнению с другими оптимизационными методами неоднократно обсуждалась в работах [11–14]. Так, в [11] приведено сравнение метода дифференциальной эволюции с другими методами (генетический алгоритм, адаптивный метод имитации отжига, алгоритм Нелдера—Мида и др.) при решении задачи минимизации целевой функции. Для большинства рассматриваемых задач метод дифференциальной эволюции показал лучшие результаты по сравнению с указанными численными методами с точки зрения наименьшего необходимого количества обращений к целевой функции. В [12] продемонстрировано превосходство метода дифференциальной эволюции в плане минимального времени решения задач над другими стохастическими методами оптимизации, такими как метод роя частиц, метод имитации отжига.

Целью данной работы является создание эволюционного алгоритма поиска оптимальных начальных концентраций каталитической реакции на основе её кинетической модели.

Постановка задачи.

Пусть кинетическая модель каталитической реакции описывается системой обыкновенных дифференциальных уравнений

$$dx/dt = f(t, x(t), T) \quad (1)$$

с начальными условиями

$$x_i(0) = x_i^0, \quad i = \overline{1, n}, \quad (2)$$

где $x(t) = (x_1(t), x_2(t), \dots, x_n(t))^T$ — вектор значений концентраций веществ (вектор фазовых переменных); $t \in [0, t_1]$ — время; T — температура; $f(x(t), T, t) = (f_1(x(t), T, t), f_2(x(t), T, t), \dots, f_n(x(t), T, t))^T$ — непрерывная вместе со своими частными производными вектор-функция.

В задаче определения оптимальных начальных концентраций веществ каталитической реакции параметром управления является вектор начальных концентраций веществ $x(0) = (x_1(0), x_2(0), \dots, x_n(0))^T$. Положим, что на значения начальных концентраций наложены ограничения вида

$$0 \leq x_i(0) \leq x_i^{\max}(0), \quad i = \overline{1, n}. \quad (3)$$

Если значения концентраций веществ выражены в мольных долях, то их начальные концентрации связаны соотношением

$$\sum_{i=1}^n x_i(0) = 1. \quad (4)$$

В качестве критерия оптимальности примем функционал вида

$$G(x) = \sum_{i=1}^n \mu_i x_i(t_1) \rightarrow \max, \quad (5)$$

выражающий максимальный выход целевых продуктов реакции ($\mu_i > 0$) либо минимальный выход побочных продуктов реакции ($\mu_i < 0$) в момент времени $t = t_1$.

Требуется определить такой вектор начальных концентраций $x^*(0) = (x_1^*(0), x_2^*(0), \dots, x_n^*(0))^T$, удовлетворяющий ограничениям (3), (4), при котором критерий оптимальности (5) достигает максимального значения.

Рассмотрим процедуру перехода от абсолютных концентраций веществ x_i к их мольным долям. Пусть каталитическая реакция протекает в m стадий:



где α_{ij}, β_{ij} — стехиометрические коэффициенты, X_j — вещества, участвующие в реакции ($j = \overline{1, n}$).

Кинетическое уравнение i -й стадии реакции (6) определяется согласно закону действующих масс

$$w_i = k_i \prod_{j=1}^n x_j^{\alpha_{ij}}, \quad i = \overline{1, m},$$

где w_i — скорость стадии, k_i — константа скорости i -й стадии реакции, x_j — концентрация вещества X_j .

Изменение концентраций веществ X_j сложной каталитической реакции во времени может быть записано в виде системы дифференциальных уравнений

$$\frac{dx_j}{dt} = \sum_{i=1}^m \gamma_{ij} w_i, \quad \gamma_{ij} = \beta_{ij} - \alpha_{ij}, \quad j = \overline{1, n}. \quad (7)$$

Введём обозначение $C_0 = \sum_{i=1}^n x_i(0)$ — начальная суммарная концентрация веществ.

Пусть x_j — концентрация вещества X_j , значение которой выражено в мольных долях. Тогда $C_0 x_j$ — значение абсолютной концентрации вещества. Поэтому система дифференциальных уравнений (7) примет вид

$$\frac{d(C_0 x_j)}{dt} = \sum_{i=1}^m \left(\gamma_{ij} k_i \prod_{j=1}^n (C_0 x_j)^{\alpha_{ij}} \right). \quad (8)$$

Разделив обе части уравнения (8) на C_0 ($C_0 = \text{const}$), получим систему дифференциальных уравнений

$$\frac{dx_j}{dt} = \sum_{i=1}^m \left(\gamma_{ij} k_i C_0^{\sum_{j=1}^n \alpha_{ij} - 1} \prod_{i=1}^n x_j \right).$$

Введём обозначение $N_i = \sum_{j=1}^n \alpha_{ij}$ — порядок i -й стадии реакции (6). Тогда при переходе к концентрациям, выраженным в мольных долях, необходимо пересчитать константу скорости реакции по формуле

$$k_i^{per} = k_i C_0^{N-1}.$$

Алгоритм определения оптимальных начальных концентраций веществ. Сформулируем алгоритм поиска оптимальных начальных концентраций веществ каталитической реакции на основе метода дифференциальной эволюции. Суть метода заключается в последовательной смене поколений индивидов, математическим аналогом которых являются векторы [15, 16]. Элементы векторов-индивидов на каждой итерации алгоритма подвергаются действиям операторов мутации и скрещивания. При формировании нового поколения последовательно исследуется каждый индивид (вектор-мишень) текущей популяции и принимается решение о его переходе в новую популяцию в зависимости от приспособленности, которая определяется значением фитнес-функции [17, 19]. Чем выше значение фитнес-функции, тем особь более приспособленная, поэтому она переходит в новое поколение.

Рассмотрим в качестве популяции индивидов матрицу начальных концентраций веществ вида

$$X_0 = \begin{pmatrix} x_{11}(0) & x_{12}(0) & \dots & x_{1n}(0) \\ x_{21}(0) & x_{22}(0) & \dots & x_{2n}(0) \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ x_{m1}(0) & x_{m21}(0) & \dots & x_{mn}(0) \end{pmatrix}, \quad (9)$$

где m — размер популяции. Каждая строка матрицы X_{0i} ($i = \overline{1, m}$) представляет собой особь, которой соответствует значение приспособленности, определяемое фитнес-функцией. В качестве фитнес-функции выступает критерий оптимальности (5), для определения значения которого необходимо найти численное решение системы дифференциальных уравнений (1) с начальными условиями X_{0i} , т. е. решить прямую кинетическую задачу.

Алгоритм поиска оптимальных начальных концентраций веществ каталитической реакции состоит из следующих шагов:

1) Задаётся размер популяции m . Случайным образом с учётом ограничений (3), (4) генерируется начальная популяция — матрица X_0 размера $m \times n$. Устанавливается значение счётчика поколений $k := 1$.

2) Для каждого вектора X_{0i} (i -й строки матрицы X_0 , $i = \overline{1, m}$) вычисляется значение фитнес-функции путём решения прямой кинетической задачи.

3) Номеру вектора-мишени присваивается значение 1 ($q := 1$).

4) Случайным образом выбираются два вектора с номерами k, l , не совпадающими с вектором-мишенью. Формируется новый вектор X_{0mut} из вектора с наибольшим значением функции приспособленности X_{0max} ($max \neq q$) путём применения оператора мутации:

$$X_{0mut} = X_{0max} + p(X_{0k} - X_{0l}),$$

где $p \in [0, 5; 1]$ — параметр оператора мутации [11].

Если значение координаты вектора-мутанта выходит за пределы области допустимых значений ($x_{mutj}(0) > x_j^{max}(0)$ или $x_{mutj}(0) < 0$, $j = \overline{1, n}$), то значению $x_{mutj}(0)$ присвоить случайное значение из интервала $[0, x_j^{max}(0)]$.

5) Формируется пробный вектор начальных концентраций веществ $X_{0\text{prob}}$ следующим образом. Генерируется случайное число b_i ($i = \overline{1, n}$) на интервале $[0, 1]$. Если $b_i \leq r$ ($r \in [0, 1]$ — параметр оператора скрещивания), то i -й координате пробного вектора $X_{0\text{prob}}$ присваивается соответствующее значение i -й координаты вектора-мутанта $X_{0\text{mut}}$, иначе i -й координате пробного вектора присваивается соответствующее значение i -й координаты вектора-мишени X_{0q} .

В результате получаем пробный вектор $X_{0\text{prob}}$, сумма значений компонентов которого может отличаться от заданной начальной суммарной концентрации веществ C_0 . Тогда необходимо преобразовать координаты вектора $X_{0\text{prob}}$ по формуле

$$x_{\text{prob}j}(0) := \frac{x_{\text{prob}j}(0)}{\sum_{l=1}^n x_{\text{prob}l}(0)} C_0.$$

Если расчёт концентраций производится в мольных долях, то для пробного вектора значение начальной суммарной концентрации веществ может быть отлично от 1 (нарушается условие (4)). В этом случае необходимо пересчитать значения координат пробного вектора по формуле

$$x_{\text{prob}j}(0) := \frac{x_{\text{prob}j}(0)}{\sum_{l=1}^n x_{\text{prob}l}(0)},$$

тем самым обеспечивая выполнение условия (4).

6) Вычисляется значение фитнес-функции для пробного вектора $X_{0\text{prob}}$.

7) Если значение фитнес-функции для пробного вектора $X_{0\text{prob}}$ больше значения фитнес-функции для вектора-мишени X_{0q} , то в новую популяцию помещается вектор $X_{0\text{prob}}$, иначе вектор X_{0q} .

8) Переход к следующей итерации поиска. Если $q < m$, то $q := q + 1$, и перейти к шагу 4, иначе перейти к шагу 9.

9) Проверка условия окончания поиска решения.

Вычислить расстояние между векторами текущей X_0^k и предыдущей X_0^{k-1} популяций ρ_{ij} ($i, j = \overline{1, m}$) и изменение фитнес-функций Δ_{ij} ($k \geq 2$):

$$\rho_{ij} = \|X_{0i}^k - X_{0j}^{k-1}\| = \sqrt{\sum_{l=1}^n (x_{il}^k(0) - x_{jl}^{k-1}(0))^2}, \quad \Delta_{ij} = |G(x_i^k) - G(x_j^{k-1})|, \quad i, j = \overline{1, m},$$

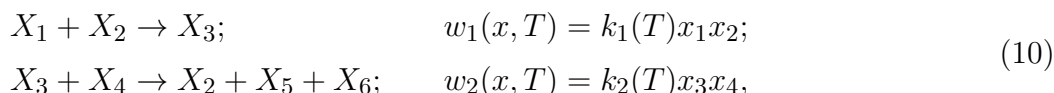
где $x_i^k(t)$, $x_j^{k-1}(t)$ — векторы значений концентраций веществ, вычисленные при наборах начальных концентраций X_{0i}^k , X_{0j}^{k-1} .

Если на протяжении d поколений выполнены условия $\rho_{ij} < \varepsilon$, $\Delta_{ij} < \varepsilon$ (ε — заданная малая величина, $\varepsilon > 0$), т. е. происходит незначительное изменение популяции и фитнес-функции, то следует остановить поиск решения и выбрать из последней матрицы X_0 строку с наибольшим значением фитнес-функции. В противном случае увеличить счётчик поколений k на 1 и перейти к шагу 3.

Выбранная строка матрицы X_0 является приближённым решением задачи поиска оптимальных начальных концентраций каталитической реакции.

Вычислительный эксперимент. Используя сформулированный эволюционный алгоритм, вычислим оптимальные начальные концентрации реагентов для реакции аминометилирования тиолов с помощью тетраметилметандиамина. Продукты данной реакции применяются для эффективной защиты растений от вредителей, а также в качестве противокоррозионных, противозадирных, противоизносных присадок к топливу и маслам.

Схема реакции аминометилирования тиолов с помощью тетраметилметандиамина и соответствующие уравнения скоростей стадий имеют вид [20]



где X_1 — $N_2(CH_3)_4$, X_2 — Sm, $X_3 = N_2(CH_3)_4[Sm]$, X_4 — HSC_5H_{11} , X_5 — $(CH_3)_2NSC_5H_{11}$, X_6 — $(CH_3)_2NH$, $x = (x_1, x_2, \dots, x_6)$ — вектор концентраций веществ реакции (моль/л), $k = (k_1, k_2)$ — вектор констант скоростей стадий (л/(моль · ч)), рассчитываемых по уравнению Аррениуса.

Динамика концентраций веществ реакции аминометилирования тиолов описывается системой обыкновенных дифференциальных уравнений:

$$\begin{aligned} \frac{dx_1}{dt} &= -w_1; & \frac{dx_2}{dt} &= -w_1 + w_2; & \frac{dx_3}{dt} &= w_1 - w_2; \\ \frac{dx_4}{dt} &= -w_2; & \frac{dx_5}{dt} &= w_2; & \frac{dx_6}{dt} &= w_2, \end{aligned} \quad (11)$$

с начальными условиями:

$$x_1(0) = x_1^0, \quad x_2(0) = x_2^0, \quad x_4(0) = x_4^0, \quad x_i(0) = 0, \quad i = 3, 5, 6. \quad (12)$$

Значения кинетических констант данной реакции при $T = 60$ °С равны $k_1 = 257$ л/(моль · ч), $k_2 = 57,4$ л/(моль · ч); значения энергий активации равны $E_1 = 68\,617,6$ Дж/моль, $E_2 = 34\,727,2$ Дж/моль [20].

Пусть значения концентраций x_j выражены в мольных долях. Так как схема реакции аминометилирования тиолов описывается двумя стадиями, каждая из которых является реакцией второго порядка, то пересчёт констант скоростей осуществляется по формуле $k_i^{per} = k_i C_0$, где $C_0 = 1,035$ моль/л [20].

Исходными веществами реакции синтеза аминометилирования тиолов являются X_1 , X_2 , X_4 . Пусть концентрации данных веществ в начальный момент времени связаны соотношением

$$x_1(0) + x_2(0) + x_4(0) = 1. \quad (13)$$

Начальные концентрации остальных веществ равны нулю.

Необходимо найти вектор начальных концентраций $x^*(0) = (x_1^*(0), x_2^*(0), x_4^*(0))$ веществ X_1 , X_2 , X_4 , который удовлетворяет условиям (4), (13) и обеспечивает в конце реакции ($t_1 = 1,5$ ч) максимальное значение концентрации продукта X_5 :

$$G(x) = x_5(t_1) \rightarrow \max. \quad (14)$$

Для решения поставленной задачи на языке программирования Delphi написана программа, реализующая алгоритм метода дифференциальной эволюции. Для получения численного решения прямой кинетической задачи применён метод Рунге—Кутты четвёртого

Результаты исследования чувствительности значения критерия оптимальности к параметрам алгоритма дифференциальной эволюции

Номер эксперимента	p	r	m	Количество удачных запусков	$G_{\max}(x)$
1	0,8	0,7	10	7	0,342–0,453
2	0,8	0,7	15	11	0,442–0,453
3	0,8	0,7	20	17	0,451–0,453
4	0,8	0,7	25	19	0,452–0,453
5	0,8	0,7	30	20	0,453
6	0,8	0,7	40	20	0,453
7	0,8	0,7	50	20	0,453
8	0,5	0,1	10	8	0,449–0,453
9	0,5	0,1	15	19	0,452–0,453
10	0,5	0,1	20	20	0,453
11	0,5	0,1	25	20	0,453
12	0,5	0,1	30	20	0,453
13	0,5	0,1	40	20	0,453
14	0,5	0,1	50	20	0,453
15	0,6	0,8	10	3	0,348–0,453
16	0,6	0,8	15	16	0,452–0,453
17	0,6	0,8	20	20	0,453
18	0,6	0,8	25	20	0,453
19	0,6	0,8	30	20	0,453
20	0,6	0,8	40	20	0,453
21	0,6	0,8	50	20	0,453

порядка. В качестве условия окончания работы алгоритма принято несущественное изменение популяции и её приспособленности на протяжении пяти поколений ($\varepsilon = 10^{-5}$, $d = 5$).

В ходе решения задач (10)–(14) проведена серия вычислительных экспериментов с различными значениями параметров алгоритма дифференциальной эволюции. Для каждого набора параметров проведено 20 запусков программы. В таблице приведены значения критерия оптимальности $G(x)$ для различных наборов параметров и количество удачных запусков, при которых достигался максимум критерия оптимальности. Из таблицы видно, что решение стабилизируется при размере популяции $m = 30$, при этом изменение параметров скрещивания r и параметра мутации p не оказывает влияния на решение задачи при данном значении m .

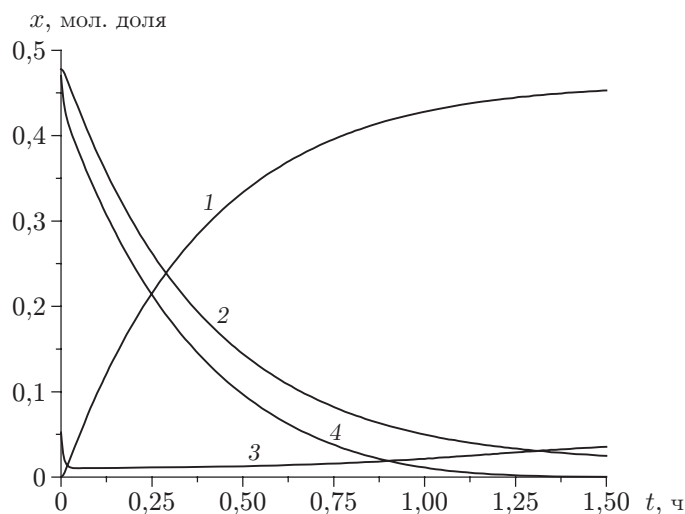
В результате проведённых вычислений для реакции аминотилирования тиолов установлено, что наибольшее значение концентрации продукта реакции X_5 при $T = 60$ °C можно получить при следующем наборе начальных концентраций исходных веществ (мол. доля):

$$x_1^*(0) = 0,4699; \quad x_2^*(0) = 0,0522; \quad x_4^*(0) = 0,4779. \quad (15)$$

Тогда максимальная концентрация целевого продукта X_5 составит 0,453 мольные доли.

На рисунке показана динамика концентраций исходных веществ X_1 , X_2 , X_4 и продукта реакции X_5 на протяжении 1,5 ч, вычисленная путём решения системы дифференциальных уравнений (11) с начальными условиями (15).

В [21] экспериментальным путём установлено, что максимальный выход целевого продукта реакции X_5 достигается при следующем мольном соотношении исходных веществ:



Изменение концентраций веществ реакции аминотетирования тиолов
(1 — X_5 , 2 — X_4 , 3 — X_2 , 4 — X_1)

$$x_1^{ex}(0) : x_2^{ex}(0) : x_4^{ex}(0) = 12 : 0,5 : 10. \quad (16)$$

Для сравнения вычисленных значений начальных концентраций (15) с опытными данными концентрации (16) переведены в молярные доли. Относительная погрешность вектора начальных концентраций составила

$$\delta(x^*(0)) = \frac{\|x^{ex}(0) - x^*(0)\|}{\|x^{ex}(0)\|} \cdot 100 \% = 11,18 \%, \quad (17)$$

где

$$\|x^{ex}(0) - x^*(0)\| = \sqrt{\sum_{i=1}^n |x_i^{ex}(0) - x_i^*(0)|^2}, \quad \|x^{ex}(0)\| = \sqrt{\sum_{i=1}^n |x_i^{ex}(0)|^2}.$$

Из значения погрешности (17) видно, что вычисленные оптимальные начальные концентрации приближённо описывают результаты эксперимента. В связи с этим делается вывод о корректной работе алгоритма. Поэтому можно применять программу для расчёта оптимальных начальных концентраций реакции аминотетирования тиолов, изменяя условия химического опыта и не расходуя при этом реагенты.

Заключение. Таким образом, созданный алгоритм поиска оптимальных начальных концентраций можно применять при исследовании механизмов каталитических реакций. Алгоритм сочетает принципы эволюционных вычислений с теоретическими основами моделирования каталитических реакций в части построения их кинетических моделей. Преимуществами алгоритма являются отсутствие чувствительности к начальному приближению решения задачи и простая программная реализация с достаточно эффективной схемой вычислений.

С помощью программы, реализующей сформулированный алгоритм, проведён вычислительный эксперимент для реакции аминотетирования тиолов с помощью тетраметилметандиамина, описываемой нелинейной кинетической моделью. Определены оптимальные концентрации начальных веществ, обеспечивающие максимальное значение концентрации целевого продукта реакции в конечный момент времени протекания реакции.

Разработанные программу и алгоритм поиска оптимальных начальных концентраций можно применять и для других каталитических реакций путём модификации этапа задания начальной популяции, замены критерия оптимальности и блока решения прямой кинетической задачи.

Финансирование. Исследование выполнено в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования Российской Федерации. Код научной темы FZWU-2023-0002.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Biegler L. T.** Integrated optimization strategies for dynamic process operations // *Theor. Found. Chem. Eng.* 2017. **51**, N 6. P. 910–927.
2. **Островский Г. М., Зиятдинов Н. Н., Емельянов И. И.** Синтез оптимальных систем простых ректификационных колонн с рекуперацией тепла // *ДАН.* 2015. **461**, № 2. С. 189–192.
3. **Santos L., Villas-Boas F., Oliveira A. R., Perin C.** Optimized choice of parameters in interiorpoint methods for linear programming // *Computational Optimization and Applications.* 2019. **73**, Iss. 1. P. 535–574.
4. **Антипина Е. В., Мустафина С. А., Антипин А. Ф.** Численный алгоритм идентификации кинетической модели химической реакции // *Вестн. Технологического ун-та.* 2019. **22**, № 9. С. 13–17.
5. **Mohamed A. W., Mohamed A. K.** Adaptive guided differential evolution algorithm with novel mutation for numerical optimization // *International Journ. Machine Learning and Cybernetics.* 2019. N 10. P. 253–277.
6. **Рапопорт Э. Я., Плешивцева Ю. Э.** Оптимальное управление подвижными объектами технологической теплофизики // *Автометрия.* 2022. **58**, № 4. С. 3–19. DOI: 10.15372/AUT20220401.
7. **Xue B., Yao X.** A survey on evolutionary computation approaches to feature selection // *IEEE Trans. Evolutionary Computation.* 2016. **20**, Iss. 4. P. 606–626.
8. **Карпенко А. П.** Эволюционные операторы популяционных алгоритмов глобальной оптимизации // *Математика и математическое моделирование.* 2018. № 1. С. 59–89.
9. **Wang Y., Li H-X., Huang T., Li L.** Differential evolution based on covariance matrix learning and bimodal distribution parameter setting // *Appl. Soft Computing.* 2014. **18**. P. 232–247.
10. **Zhu H., He Y., Tsang E., Xizhao W.** Discrete differential evolution for the discounted {0–1} knapsack problem // *Int. Journ. Bio-Inspired Computation.* 2017. **10**, N 4. P. 219–238.
11. **Storn R., Price K.** Differential evolution — A simple and efficient heuristic for global optimization over continuous spaces // *Journ. Global Optimization.* 1997. **11**. P. 341–359.
12. **Ковалевич А. А., Якимов А. И., Албкеират Д. М.** Исследование стохастических алгоритмов оптимизации для применения в имитационном моделировании систем // *Информационные технологии.* 2011. № 8. С. 55–60.
13. **Das S., Suganthan P. N.** Differential evolution: A survey of the state-of-the-art // *IEEE Trans. Evolutionary Computation.* 2011. **15**, N 1. P. 4–31.
14. **Пупков К. А., Феоктистов В. А.** Алгоритм дифференциальной эволюции для задач технического проектирования // *Информационные технологии.* 2004. № 8. С. 25–31.
15. **El-Quliti S. A., Ragab A. H., Abdelaal R. et al.** A nonlinear goal programming model for university admission capacity planning with modified differential evolution algorithm // *Mathematical Problems in Eng.* 2015. **2015**. 892937. 13 p.
16. **Mohamed A. W.** A novel differential evolution algorithm for solving constrained engineering optimization problems // *Journ. Intell. Manufacturing.* 2018. **29**, Iss. 4. P. 659–692.

17. **Мигов Д. А., Волжанкина К. А., Родионов А. С.** Генетические алгоритмы оптимальной по критерию надёжности расстановки стоков в беспроводных сенсорных сетях // Автоматизация. 2021. **57**, № 3. С. 19–29. DOI: 10.15372/AUT20210303.
18. **Wang Y, Liu Z. Z., Li J. et al.** On the selection of solutions for mutation in differential evolution // Frontiers of Computer Science. 2018. **12**, Iss. 2. P. 297–315.
19. **Mohamed A. W.** An improved differential evolution algorithm with triangular mutation for global numerical optimization // Computers & Industrial Eng. 2015. **85**. P. 359–375.
20. **Новичкова А. В.** Численный анализ реакционной способности олефинов и алюминийорганических соединений на основе кинетических моделей частных и общих реакций: Дисс. ... канд. физ.-мат. наук. Уфа, 2015. 110 с.
21. **Хайруллина Р. Р., Акманов Б. Ф., Тюмкина Т. В. и др.** N,N,N',N'-тетраметилметандиамин — эффективный реагент для аминотилирования тиолов // Журнал органической химии. 2012. **48**, Вып. 2. С. 189–193.

Поступила в редакцию 16.01.2023

После доработки 12.03.2023

Принята к публикации 10.04.2023
